

Alicja Gawron

Wydział Matematyki, Informatyki i Mechaniki

Leki szybciej i taniej? ML w odkrywaniu leków

Machine learning (ML) jest na ustach każdego w ostatnich latach. Dlatego też nie dziwne, że branża farmaceutyczna została “zainfekowana” nową technologią. Tradycyjnie odkrywanie leków rozpoczyna się ekstensywnymi badaniami nad chorobą i próbą zrozumienia jej mechanizmów. Następnie poszukuje się związków skutecznie oddziałujących z konkretnym miejscem czy białkiem, później wykonywane są badania (przed)kliniczne¹. Cały proces może trwać do kilkunastu lat. Pomysłów na zoptymalizowanie tego schematu jest wiele, co pokrótce spróbuję przedstawić.

Najistotniejszą cechą leku, jest prawidłowe oddziaływanie z docelową strukturą. Analizując struktury chemiczne białek, ML może odkryć związki chemiczne o dużym potencjale terapeutycznym (o największych szansach by ostatecznie zostać uznanym jako skuteczny, bezpieczny lek). Przewiduje, które cząsteczki najprawdopodobniej wiążą się z celem, pozwalając naukowcom skupić się na najbardziej obiecujących kandydatach na wcześniejszym etapie procesu. Dzięki czemu w dalszych fazach jest mniejsze prawdopodobieństwo, że włożony wysiłek i czas pójdą na marne, jeżeli okaże się np. nieskuteczny. Minimalizacja kosztów, zwiększanie zysku.

Innym wykorzystaniem ML, jest tzw. *drug repurposing* czyli wykorzystywanie już zatwierdzonych leków do leczenia innych chorób. Ten sposób jest wyjątkowo korzystny, gdyż każdy etap można znacząco skrócić. Zamiast, powiedzmy, 15 lat jesteśmy w stanie wprowadzić na rynek lek w ciągu 6. System BenevolentAI między innymi na tym skupia. Analizuje ogromne ilości danych w celu zidentyfikowania potencjalnych dopasowań pomiędzy istniejącymi lekami a chorobami, których

¹ <https://www.frontiersin.org/journals/drug-discovery/articles/10.3389/fddsv.2023.1201419/full>

pierwotnie nie miały leczyć. W trakcie pandemii SARS-Covid-19 odkryto iż baricitinib (pierwotnie wykorzystywane do leczenia Reumatoidalnego zapalenia stawów) jest równie skuteczne przy redukcji stanów zapalnych połączonych z ciężkimi przypadkami zainfekowania Covid-19.

W idealistycznym świecie związki byłyby *de novo* tworzone o pożądanych właściwościach. Wystarczyłoby zidentyfikować z jakim miejscem powinno się wiązać, określić jaką strukturę przestrzenną powinno mieć i parę innych technikaliów et volia lek na każdą chorobę jest znany. Jak się okazuje istnieją firmy specjalizujące się w tym zakresie np. Generate Biomedicines, które przeanalizowało miliony białek aby nakreślić ogólny schemat fałdowania białek. Co więcej wygenerowali białko GB-0669², które atakowało część wirusa SARS-Covid-2 uniemożliwiając zainfekowanie komórki.

Najstarsze biotechnologiczne firmy w tej dziedzinie istnieją na rynku ledwo ponad dekadę. Jest zbyt mało danych by jednoznacznie stwierdzić czy faktycznie wykorzystywanie ML zrewolucjonizowało branżę farmaceutyczną. Najbliższe kilka lat pokaże czy takie podejście okaże się na tyle opłacalne by wykorzystywać go na masową skalę. Osobiście uważam, że potencjał w tej dziedzinie jest ogromny, wystarczy znaleźć sposób, by go efektywnie okiełznać.

²

<https://generatebiomedicines.com/media-center/from-computer-to-clinic-how-ai-unlocked-the-potential-of-gb-0669>